

$$V(r) = - \int \frac{\rho(r')}{|r-r'|} dV' + \sum_{\alpha} \frac{Z_{\alpha} |e|}{|r-R_{\alpha}|} \quad (1)$$

где $\rho(r)$ – электронная плотность, Z_{α} и R_{α} – заряд и радиус-вектор ядра α .

В качестве языка программирования используется Фортран. Использование Фортрана, как основного алгоритмического языка, в первую очередь мотивировано самой сутью технологии или метода МД моделирования. В компьютерной реализации МД обычно приходится иметь дело с огромным набором схожих фрагментов или циклов, которые выполняются многократно одинаково.

Программа рассчитана на исследование молекул, содержащих атомы углерода, кислорода, водорода и азота. Максимальное число атомов – 100.

В настоящее время программа находится в начальной стадии разработки. Реализуется метод молекулярной механики. Проводится работа по тестированию программы.

Список публикаций:

[1] Соловьев М. Е., Соловьев М. М. Компьютерная химия – М.: Солон-Пресс, 2005. – 536 с.

[2] Майер Г. В., Артюхов В. Я., Базыль О. К и др. Электронно-возбужденные состояния и фотохимия органических соединений. - Новосибирск: Наука, 1997. – 232 с..

Численные методы для поиска управления квантовыми системами

Шауро Виталий Павлович

Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН

Shaurkin@hotmail.com

За последние два десятилетия различные методы управления квантовыми системами получили значительное развитие, как в части теории, так и в экспериментальной реализации. Актуальность этой области исследований обусловлена большой практической значимостью решаемых задач - от управления химическими реакциями до создания квантового компьютера и сверхбезопасных квантовых каналов связи.

Наверное, одним из наиболее интересных и многообещающих направлений, где необходим высокоточный контроль над квантовым состоянием, является обработка квантовой информации. Из теории квантовых вычислений известно, что для успешного выполнения квантовых алгоритмов необходимо, чтобы ошибка, приходящаяся на каждую элементарную логическую операцию (вентиль), была меньше некоторого порогового значения. Для обеспечения этого условия в эксперименте необходимы эффективные методы управления динамикой квантовой системы. К сожалению, разработка таких методов с помощью аналитических подходов крайне сложна для квантовых систем с большим числом состояний. В связи с этим зачастую прибегают к численным методам, позволяющим найти оптимальное управляющее воздействие на систему для получения нужного квантового состояния или, в общем случае, определенной унитарной эволюции системы.

При численном решении задачи управления ее, как правило, сводят к задаче нахождения максимума некоторого функционала, зависящего от параметров внешних управляющих полей, гамильтониана квантовой системы, а также дополнительных ограничительных параметров на эволюцию системы, если таковые имеются. Простейший пример такого функционала – норма Гильберта-Шмидта

$$\Phi = \frac{1}{N} \left| \text{Tr} \left(U_f^\dagger U(H(t), T) \right) \right|, \quad (1)$$

где N – размерность гильбертова пространства, U_f – требуемый оператор эволюции (например, выполняющий нужную квантовую логическую операцию), $U(H(t), T)$ – оператор эволюции системы в течение времени T с гамильтонианом

$$H(t) = H_0 + \sum_k u_k(t) H_k. \quad (2)$$

Здесь H_0 – «внутренний» гамильтониан, включающий все постоянные взаимодействия в системе, а $u_k(t) H_k$ – взаимодействие с k -тым управляющим полем с зависящей от времени амплитудой $u_k(t)$.

В настоящее время для поиска параметров $u_k(t)$, максимизирующих функционал типа (1), разработано несколько численных подходов, наиболее популярными из которых являются алгоритмы Кротова (см., например, [1]), GRAPE [2] и их различные модификации, например, учитывающие специфику конкретных

задач или ускоряющие сходимость. Несмотря на различия в формулировке, оба алгоритма, по сути, являются вариациями обычного метода градиентного спуска. Данные численные методы используются не только для решения конкретных экспериментальных задач, но и нередко применяются в теоретических исследованиях. Так, в работе [3] мы показали полное соответствие между численными данными, полученными модифицированным алгоритмом GRAPE, и аналитическим решением для довольно нетривиальной задачи управления спином $I=1$ в контексте обработки квантовой информации.

Не так давно, в работе [4] был предложен алгоритм, в котором применяется немного отличный от выше перечисленных алгоритмов принцип. Для поиска управляющих полей предлагается с помощью алгоритма Ньютона-Рафсона искать минимум (ноль) функционала вида

$$\tilde{\Phi} = P \log(U_j^\dagger U(H(t), T)), \quad (3)$$

где P – оператор проекции на подходящий базис гильбертова пространства, например, $su(N)$. В этом случае, при проецировании теряется меньше информации о динамике системы, по сравнению с градиентными методами и наблюдается существенно лучшая сходимость. Тем не менее, в литературе не встречаются примеры использования данного алгоритма, кроме оригинальной работы [4].

Все перечисленные алгоритмы являются локальными. В связи с этим остро стоит проблема выбора начальных условий для функций $u_k(t)$, а также вопрос о локальных экстремальных точках рассматриваемых функционалов. Экстремальные точки для функционала (1) определяются из условия равенства нулю его вариации

$$\frac{\partial \Phi}{\partial u(t)} = \frac{\partial \Phi}{\partial U} \frac{\partial U}{\partial u(t)} = 0. \quad (1)$$

Не сложно показать, что экстремумы, обусловленные равенством нулю первого множителя (кинетические критические точки) не приводят к локальным минимумам или максимумам функционала. С другой стороны, исследовать экстремумы, связанные со вторым множителем (динамические критические точки), крайне сложно. Из-за высокой эффективности градиентных алгоритмов, быстро сходящихся к глобальным решениям для простых систем, долгое время считалось, что динамические критические точки также не приводят к «ловушкам» при численных расчетах. В работе [5], путем многократного повторения расчетов со случайными начальными условиями, мы показали существование локальных решений, существенно затрудняющих поиск глобального максимума функционала (1), а также качественно объяснили их природу.

Развитие и оптимизация численных методов для задач управления квантовыми системами обещает значительные успехи во многих направлениях квантовой физики, что в конечном итоге приведет нас к созданию уникальных устройств, в полной мере использующих особенности квантово-механического мира.

Список публикаций:

- [1] I. Maximov, Z. Tošner, N. Nielse, J. Chem. Phys., 128, 184505 (2008).
- [2] N.Khaneja, T.Reiss, C.Kehlet et al., J. Magn. Reson., 172, 296 (2005).
- [3] V.Shauro, Quant. Inf. Proc., 14(7), 2345 (2015)
- [4] P. de Fouquieres, Phys. Rev. Lett., 108, 110504 (2012)
- [5] V.P. Shauro and V.E. Zobov, Phys. Rev. A 88, 042320 (2013).

Разработка системы доступа к системе архивирования ускорительного комплекса ВЭПП-2000

Шубина Ольга Сергеевна

Новосибирский национальный исследовательский государственный университет

Сенченко Александр Игоревич

olgashubina2011@gmail.com

Ускорительный комплекс ВЭПП-2000 был запущен после глубокой модернизации, в рамках которой была проведена реконструкция бустера БЭП для расширения рабочего диапазона энергий до 1 ГэВ, а также введен в строй канал транспортировки частиц (К-500) от Инжекционного Комплекса (ИК) до БЭП.

В течение экспериментальной работы в период с 2009 по 2013 была введена в строй и активно эксплуатировалась Система Журналирования(СЖ). Данная система предназначена для сохранения текущих параметров комплекса для последующего изучения и анализа. Для эффективного взаимодействия (просмотра, поиска, выгрузка) с СЖ, необходимо наличие развитого как программного, так и графического интерфейса.